

束缚态特征温度方法及应用

何新 江涛 张振福 杨俊波

Bound-state characteristic temperature method and its applications

He Xin Jiang Tao Zhang Zhen-Fu Yang Jun-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 085201 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212115

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212115>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种计算非平衡等离子体中粒子能级布居的简化方法

A simplified method of calculating electronic energy level populations in nonequilibrium plasmas

物理学报. 2021, 70(14): 145202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202119>

非平衡感应耦合等离子体流场与电磁场作用机理的数值模拟

Numerical investigation on interaction mechanisms between flow field and electromagnetic field for nonequilibrium inductively coupled plasma

物理学报. 2019, 68(18): 185202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190865>

高超声速4 : 1椭圆锥横流不稳定性实验研究

Experimental research on crossflow instability for a hypersonic 4 : 1 elliptic cone

物理学报. 2021, 70(24): 244702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210807>

气体压强对纳秒激光诱导空气等离子体特性的影响

Effect of ambient gas pressure on characteristics of air plasma induced by nanosecond laser

物理学报. 2020, 69(5): 057401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191540>

纳秒脉冲激光诱导空气等离子体的近红外辐射特性

Near infrared characteristics of air plasma induced by nanosecond laser

物理学报. 2020, 69(2): 029502 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190753>

脉冲电弧等离子体激励控制超声速平板边界层转捩实验

Experimental study on supersonic plate boundary layer transition under pulsed arc plasma excitation control

物理学报. 2020, 69(15): 155201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200216>

束缚态特征温度方法及应用*

何新¹⁾ 江涛^{2)†} 张振福¹⁾ 杨俊波¹⁾¹⁾ (国防科技大学文理学院, 长沙 410073)²⁾ (中国空气动力研究与发展中心计算空气动力研究所, 绵阳 621000)

(2021 年 11 月 17 日收到; 2021 年 12 月 19 日收到修改稿)

随着高超声速飞行器速度增大, 激波层空气等离子体中的原子发射谱线成为辐射加热主要来源, 因此研究原子激发非常重要. 考虑到处于热非平衡态的空气等离子体, 平衡态统计理论不适用. 精细物理模型 (如碰撞辐射模型) 虽然可以处理热非平衡问题且准确度高, 但计算量太大, 难于工程应用. 本文采用束缚态特征温度法, 结合 FIRE II 激波管实验中的非平衡空气等离子体, 对原子激发进行了分析. 计算得到的原子能级布居与碰撞辐射模型符合, 说明简化计算是合理的, 计算效率提高了 2000 倍以上, 且能够保证一定的精度.

关键词: 高超声速, 空气等离子体, 非平衡, 能级布居, 辐射加热**PACS:** 52.25.-b, 52.25.Kn, 05.10.-a**DOI:** 10.7498/aps.71.20212115

1 引言

在载人航天、太空探测等应用中, 高超声速飞行器返回时被大强度激波包裹, 激波层中的空气将变为等离子体^[1]. 当飞行器速度很高时, 其所承受热负荷的很大一部分源于激波层的辐射加热^[2]. 为了评估辐射加热、指导热防护设计, 必须研究空气等离子体的辐射特性^[3,4].

分析原子激发是这其中的一个十分重要的方面, 因为在高超声速激波层空气等离子体中, 原子的辐射将占据主导地位^[5,6]. 例如阿波罗飞行器返回时, 约 90% 的激波层辐射来自于原子发射谱线^[7].

在高超声速激波层中, 部分空气等离子体处于热平衡态, 部分处于热非平衡态^[8]. 对于热平衡空气等离子体可以方便地利用 Boltzmann 分布或 Saha 方程得到原子能级布居^[9]. 然而, 对于热非平衡空气等离子体, 计算其中的原子能级布居是一项挑战.

特别是对于高超声速航天器大尺度三维激波

层计算, 其中常常包含超大量的热力学状态点 (有限元), 在这种情况下, 已发展的、较常用的碰撞辐射 (collisional-radiative, CR) 模型^[3,4,8–11], 虽然能够处理热非平衡问题, 且准确度高, 但计算耗费超大, 甚至无法实现^[12].

为了既能处理热非平衡问题, 又在误差可接受的前提下降低计算成本, 研究者开发了一些简化计算方法. 例如, 采用准稳态 (quasi-steady-state, QSS) 近似、多温度 Boltzmann 分布等来计算得到空气等离子体的原子激发数据^[13–17], 以便与大型飞行器流场计算耦合应用. 然而, 目前这些简化方法普遍基于精细 CR 模型的思想, 需要用到许多微观粒子相互作用速率系数, 这些系数难以保证准确, 从而导致这些简化方法之间、它们与 CR 模型之间存在较明显的偏差^[18,19], 直接影响到飞行器辐射加热评估和热防护策略选择. 可以说, 针对高超声速大尺度三维等离子体计算需求, 能够保证一定精度且快速计算分析原子能级布居, 是研究者非常关注的课题和不断追求的目标.

* 国家数值风洞工程 (批准号: NNW2019ZT3-B07) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fengqiaoren999@163.com

在前期工作中, 所提出的束缚态特征温度法无需用到微观粒子相互作用系数, 在激光等离子体相互作用类似情形的计算中得到验证. 本文在该方法基础上, 对高超声速空气等离子体中的原子激发进行研究, 尝试发展适用于高超声速激波层等离子体的解决途径. 选取高超声速实验中典型的热非平衡和热平衡空气等离子体作为研究对象, 计算其中氮和氧原子能级布居, 并与 CR 模型、其他简化模型的结果进行对比, 分析计算准确度和计算效率.

2 计算方法

本文关注广泛存在于载人航天器返回、太空探测器再入等航天应用领域的空气等离子体状态, 其自由电子温度一般不高 (30000 K 以下), 且为弱电离. 通常在这样的空气等离子体中, 只需考虑原子 (N, O) 及其一价离子 (N^+ , O^+) 的存在 [15].

根据束缚态特征温度法 [20], 若设某种原子的电离能为 I , 则表征该种原子能级布居的特征参数 T_b 可由下式计算:

$$\frac{n^+ n_e}{n} = \frac{2Q^+(T_e)}{Q(T_b)} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{I}{k T_b} \right), \quad (1)$$

其中 T_b 为该种原子的束缚态特征温度, T_e 为自由电子温度, n , n^+ 和 n_e 分别为原子、一价离子和自由电子的数密度, m_e 为自由电子质量, k 和 h 分别为 Boltzmann 常数和 Planck 常数, $Q(T_b)$ 和 $Q^+(T_e)$ 分别为原子和一价离子的配分函数:

$$Q(T_b) = \sum_i g_i \exp \left(-\frac{E_i}{k T_b} \right),$$

$$Q^+(T_e) = \sum_j g_j^+ \exp \left(-\frac{E_j^+}{k T_e} \right), \quad (2)$$

其中 E_i 和 g_i 分别是原子第 i 能级的能量和简并度, E_j^+ 和 g_j^+ 分别是一价离子第 j 能级的能量和简并度.

若已知 n , n^+ , n_e 和 T_e , 可根据 (1) 式计算出 T_b , 从而原子第 i 能级的非简并布居为:

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{n}{Q(T_b)} \exp \left(-\frac{E_i}{k T_b} \right). \quad (3)$$

实际上, (1) 式可称为修正的 Saha 方程. 这样写的好处是对热平衡和热非平衡空气等离子体都适用. 对于热平衡空气等离子体, 必然存在 $T_b = T_e$, 则 (1) 式就是众所周知的 Saha 方程 [4]; 对于热非平衡空气等离子体, 所求解出的 T_b 将与 T_e 不同, 二

者之间的差别反映了能级布居偏离热平衡分布的程度.

3 典型空气等离子体算例及结果

选取针对 Fire II 工程的地面激波管实验空气等离子体为研究对象 [21], 其中的辐射主要来源于原子谱线, 对原子能级布居 (尤其是较高能级布居) 计算非常重要. 表 1 给出了所选取的空气等离子体状态参数 (包括自由电子温度、粒子数密度), 它们分别对应 Fire II 飞行过程中的 1634, 1636 和 1643 s 时间点.

表 1 空气等离子体参数
Table 1. Parameters of air plasmas.

Fire II 时间点/s	1634	1636	1643
距离激波面/mm	25	10	7
T_e /K	10299	12899	13409
$N/(10^{16} \text{ cm}^{-3})$	1.81	1.28	1.22
$N^+/(10^{14} \text{ cm}^{-3})$	24.90	8.05	7.78
$O/(10^{15} \text{ cm}^{-3})$		3.42	10.70
$O^+/(10^{14} \text{ cm}^{-3})$		1.51	8.38
$n_e/(10^{14} \text{ cm}^{-3})$	29.00	9.68	8.99
热力学状态	近平衡	非平衡	非平衡

由 (1)—(3) 式可知, 计算能级布居还需要原子及其离子的能级参数. 本文中, N 和 O 原子能级数据来自文献 [22], N 和 O 原子电离能采用美国国家标准与技术研究院 (NIST) 数据 [23], N^+ 和 O^+ 离子能级数据来自文献 [1].

图 1 为状态点 1634-25 的氮原子非简并能级布居. 标有“Johnston”的数据由文献 [7] 中方法计算而得; 标有“Boltzmann”的数据由 T_e 下的 Boltzmann 分布, 即 (3) 式中的 T_b 换成 T_e 计算而得 (下同); 标有“Saha”的数据由另一形式的 Saha 方程计算而得 (下同):

$$\frac{n_i}{g_i} = \frac{n^+ n_e}{2Q^+(T_e)} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k T_e} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{I - E_i}{k T_e} \right). \quad (4)$$

众所周知, 若等离子体处于热平衡态, 则 T_e 下的 Boltzmann 分布与 Saha 方程的结果必然是相等的. 图 1 中, 标有“Boltzmann”和“Saha”的数据只存在轻微偏离, 说明该状态点空气等离子体处于近平衡态. 根据图 1, 对于 N 的低能级和高能级布居, 计算结果与 CR 模型一致; 对于 N 的中间一些能级布居, 计算结果介于 CR 模型和 Johnston 方法.

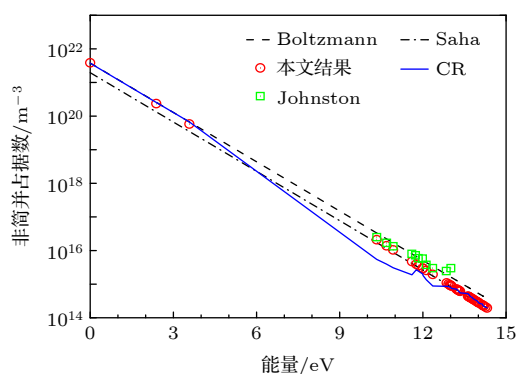


图 1 状态点 1634-25 的氮原子能级布居

Fig. 1. Energy level populations for N of Case 1634-25.

图 2 给出了状态点 1634-10 的氮原子和氧原子非简并能级布居。“Boltzmann”和“Saha”数据之间存在明显偏离,说明此状态点空气等离子体为非平衡.这是由于距离激波面较近,粒子之间能量松弛不充分造成的.

如图 2(a) 所示,除 N 原子的第 2, 3 能级外,本文计算得到的其他能级布居与 CR 模型一致;而此条件下采用 Spradian 模块得到的结果明显大于

CR 模型.如图 2(b) 所示,除 O 原子的第 2—4 能级外,本文计算得到的其他能级布居与 CR 模型符合;而 Spradian 模块的结果明显大于 CR 模型.

CR 模型是更为精细的物理模型,准确度更高.图 1 和图 2 的结果表明,若以 CR 模型为参照讨论计算精度,则本文计算精度与 Johnston 方法接近,优于 Spradian 模块.

图 3 为状态点 1634-7 的氮原子非简并能级布居.显然,此状态点为非平衡空气等离子体.如图 3(a),计算得到的第 2, 3 能级占据数略小于 CR 模型,但其他能级布居与 CR 模型一致,这与图 2 中的现象类似.图 3(b) 中还与其他简化模型的结果进行了对比.可以看出,计算结果与 Johnston 方法符合,在一些中间能级与 QSS Abba 方法符合,但整体上明显低于 QSS Park 方法.如果仍然参照 CR 模型讨论计算精度,图 3 的结果表明,在此状态条件下,本文计算精度与 Johnston 和 QSS Abba 方法接近,优于 QSS Park 方法.

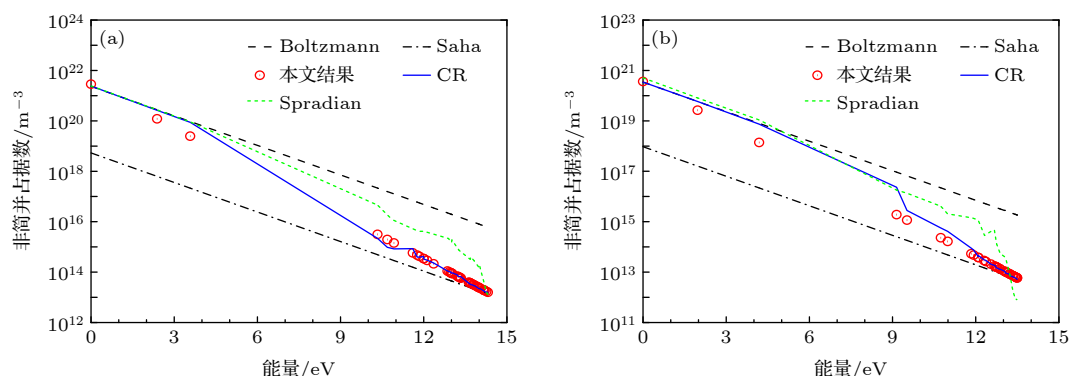


图 2 状态点 1634-10 的氮原子和氧原子能级布居 (a) N; (b) O

Fig. 2. Energy level populations for N and O of Case 1634-10: (a) N; (b) O.

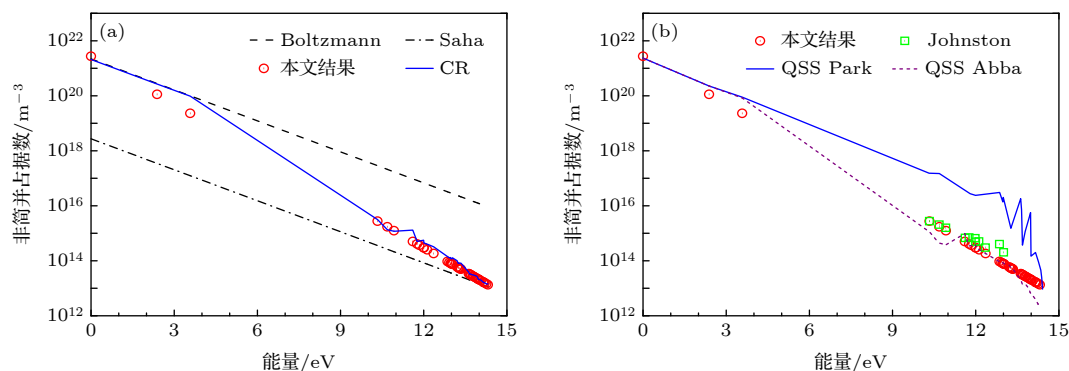


图 3 状态点 1634-7 的氮原子能级布居

Fig. 3. Energy level populations for N of Case 1634-7.

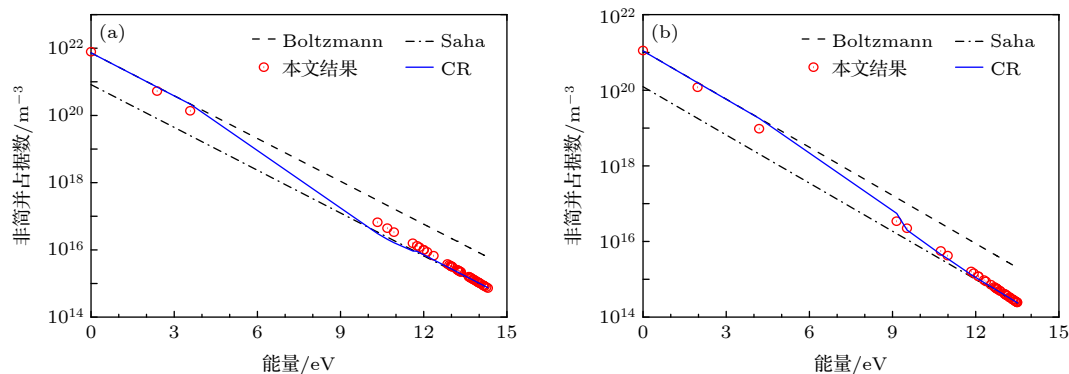


图4 状态点 1636-5 的氮原子和氧原子能级布居 (a) N; (b) O

Fig. 4. Energy level populations for N and O of Case 1636-5: (a) N; (b) O.

图4为状态点 1636-5 的氮原子和氧原子非简并能级布居. 此状态点空气等离子体虽然也是非平衡的, 但由于粒子数密度较大, 粒子之间能量松弛较图3所示情形充分, 因此“Boltzmann”和“Saha”数据之间的偏离减小. 对于N的中间一些能级, 计算得到的占据数略大于CR模型. 但总体来说, 在此状态点, 计算结果与CR模型符合.

图2—图4中, 本文所计算N原子第2—3能级、O原子第2—4能级的占据数比CR模型偏小, 对辐射加热评估的影响较小. 这是因为N和O原子的发射谱线并不包含上述能级的自发辐射跃迁^[21]. 另外, 对于N和O原子几个中间能级的占据数, 本文虽然与CR模型存在一定偏差, 但作为一种简化计算结果, 较其他简化方法在计算精度上持平或有明显提高.

图5为状态点 1643-5 的氧原子非简并能级布居. 此状态点对应 Fire II 的飞行高度低, 激波层中粒子能量松弛充分, 因此空气等离子体处于近平衡态. 由图5可知, 计算结果与CR模型一致.

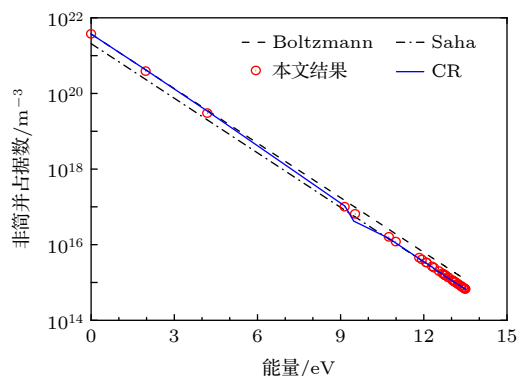


图5 状态点 1643-5 的氧原子能级布居

Fig. 5. Energy level populations for O of Case 1643-5.

上述5个不同状态点的结果表明, 本文计算得到的空气等离子体原子能级布居与CR模型基本一致, 是合理有效的. 在计算精度上, 本文与QSS Abba和Johnston简化方法接近, 优于QSS Park和Spradlian简化方法.

在工程应用中, 计算效率是必须考虑的问题. 借助普通笔记本电脑 (CPU: 2×2.60 GHz, Matlab 程序), 计算得到表1所有状态点的能级布居数据约需7 s; 而CR模型借助IBM服务器 (CPU: 6×2.53 GHz, Fortran 程序) 约需4.5 h. 即使忽略计算平台性能、程序语言效率、算法流程设计方面的差别, 计算速度也比CR模型提高了2000倍以上. 本文计算效率的提升主要源于不要求解能级布居方程组. CR模型尽可能多地考虑了影响粒子能级布居的大量微观过程, 需要求解大规模的能级布居速率方程组 (方程数量取决于所考虑能级数); 而文中其他简化方法虽然减少了所考虑的微观过程, 甚至进一步采用QSS近似, 但仍然需要求解能级布居方程组. 因此, 本文计算可与高超声速飞行器流场计算耦合, 极大降低计算成本.

4 结 论

采用束缚态特征温度法研究了高超声速激波层空气等离子体中的原子激发. 以针对 Fire II 工程的激波管实验空气等离子体为算例, 对N和O原子能级布居进行了计算, 并与CR模型、其他简化模型的结果进行了对比. 所研究的空气等离子体热力学状态包括近平衡态、非平衡态. 结果表明, 本文计算得到的原子能级布居与CR模型基本一致, 计算精度与其他简化方法接近甚至有一定提

高. 在计算效率上, 本文比 CR 模型提高了 2000 倍以上, 在工程应用 (如高速飞行器辐射加热评估) 中可大大节约计算成本.

参考文献

- [1] Park C 1990 *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics* (New York: Wiley Press) pp6-28
- [2] Park C 1993 *J. Spacecr. Rockets* **7** 385
- [3] Hansen S B, Chung H K, Fontes C J, Ralchenko Y, Scott H A, Stambulchik E 2020 *High Energy Density Phys.* **35** 100693
- [4] Piron R, Gilleron F, Aglitskiy Y, Chung H K, Fontes C J, Hansen S B, Marchuk O, Scott H A, Stambulchik E, Ralchenko Y 2017 *High Energy Density Phys.* **23** 38
- [5] Shang J S, Surzhikov S T 2011 *J. Spacecr. Rockets* **48** 385
- [6] Tauber M E, Palmer G E, Yand L 1992 *J. Thermophys. Heat Transf.* **6** 193
- [7] Johnston C O 2006 *Ph. D. Dissertation* (Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute and State University)
- [8] Wu Z 2000 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: China Academy of Engineering Physics) (in Chinese) [吴泽清 2000 博士学位论文 (北京: 中国工程物理研究院)]
- [9] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley and Los Angeles: University of California Press) p2
- [10] Ralchenko Y 2016 *Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas* (Berlin: Springer International Publishing) p127
- [11] Gao C, Jin F, Zeng J, Yuan J 2013 *New J. Phys.* **15** 015022
- [12] Gao C 2011 *Ph. D. Dissertation* (Changsha: National University of Defense Technology) (in Chinese) [高城 2011 博士学位论文 (长沙: 国防科技大学)]
- [13] Surzhikov S T 2012 *J. Heat Transf.-Trans. ASME* **134** 031002
- [14] Bansal A, Modest M F, Levin D A 2011 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **112** 1213
- [15] Laux C O 1993 *Ph. D. Dissertation* (Stanford: Stanford University)
- [16] Fujita K, Abe T 1997 *Institute of Space & Astronautical Science Report* **669** 1
- [17] Dong S K, Ma Y, Tan H P 2008 *J. Thermophys. Heat Transf.* **22** 301
- [18] Ozawa T, Modest M F, Levin D A 2010 *J. Heat Transf.-Trans. ASME* **132** 023406
- [19] He X, Chang S L, Dai S A, Yang J C 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 114401
- [20] He X, Jiang T, Gao C, Zhang Z F, Yang J B 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 145202 (in Chinese) [何新, 江涛, 高城, 张振福, 杨俊波 2021 物理学报 **70** 145202]
- [21] Panesi M, Magin T, Bourdon A, Bultel A, Chazot O 2009 *J. Thermophys. Heat Transf.* **23** 236
- [22] He X, Dang W H, Jia H H, Yin H W, Zhang H L, Chang S L, Yang J C 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 095204
- [23] Kramida A, Ralchenko Yu, Reader J, NIST ASD Team <https://physics.nist.gov/asd> [2021-10-10]

Bound-state characteristic temperature method and its applications^{*}

He Xin¹⁾ Jiang Tao^{2)†} Zhang Zhen-Fu¹⁾ Yang Jun-Bo¹⁾

1) (*College of Liberal Arts and Sciences, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Computational Aerodynamics Institute, China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China*)

(Received 17 November 2021; revised manuscript received 19 December 2021)

Abstract

As the speed of a hypersonic vehicle increases, atomic emission lines in the shock-layer will be a main source of radiative heating. Therefore, it is very important to study the atomic excitation in the air plasma in the shock layer. For a thermal nonequilibrium air plasma, the equilibrium statistical theory is not applicable. Although full models (such as the collisional-radiative model) can be used to solve nonequilibrium problems with high accuracy, they are too expensive computationally and difficult to apply to engineering. In this work, we investigate the atomic excitation in air plasmas by the bound-state characteristic temperature (BCT) method. Some cases of equilibrium and nonequilibrium air plasmas associated with the well-known FIRE II flight experiment are considered. The calculated atomic energy level populations are in good agreement with those from the CR model, thereby showing that our calculation is reasonable and has a good accuracy. The computational efficiency is more than 2000 times higher than that from the CR model. If it is used in the flow field of a hypersonic vehicle, the computational cost can be greatly reduced.

Keywords: hypersonic, air plasmas, nonequilibrium, energy level populations, radiative heating

PACS: 52.25.-b, 52.25.Kn, 05.10.-a

DOI: [10.7498/aps.71.20212115](https://doi.org/10.7498/aps.71.20212115)

^{*} Project supported by the National Numerical Windtunnel, China (Grant No. NNW2019ZT3-B07).

[†] Corresponding author. E-mail: fengqiaoren999@163.com